

В кристаллах исследуемых бромзамещенных структур наряду с галогенными связями Br...Br (тип II по классификации Г. Дисираджу)

Соединения	Контакты	RMSD, Å
дибромметан	Br...Br	1,134
	Br...H	0,219
бромметан	Br...Br	0,630
	Br...H	0,375

встречаются более слабые ван-дер-ваальсовы взаимодействия Br...Br (тип I). Максимальное отклонение геометрии структуры после оптимизации характерно для

связей Br...Br в дибромметан. Минимальное значение RMSD характерно для 1,5-дибромнафталин.

В результате статистического анализа было выявлено, что в изолированных димерах геометрия контактов Br...Br подверглась большим изменениям, чем геометрия контактов Br...H. Преимуществ в стабилизации взаимодействий за счет контактов типа II не было выявлено.

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования РФ 2014г.*

## СИНТЕЗ МОНО- И БИЦИКЛИЧЕСКИХ 1,2,4-ТРИАЗИНОВ

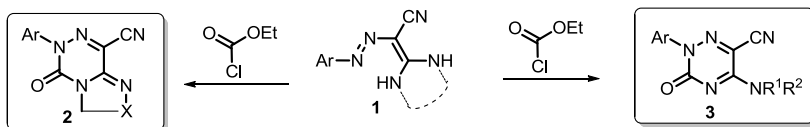
*Науменкова П.О., Книсс И.В., Гавлик К.Д., Бельская Н.П.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

1,2,4-Триазины и их производные проявляют широкий спектр биологической активности, включая противогрибковую, анти-ВИЧ, противораковую, противовоспалительную, анальгетическую и антигипертензивную активность [1]. Поэтому одним из перспективных направлений развития гетероциклической химии является разработка удобных методов получения 1,2,4-триазинов, содержащих фрагменты природных соединений и фармакофорные группы.

Удобными исходными соединениями для конструирования триазинового цикла, являются арилгидразоноамидины **1**, содержащие в своей структуре линейный или циклический амидиновый фрагмент. Одним из активных электрофильных агентов, широко используемым для гетероциклизаций, который позволяет ввести в молекулы синтезируемых соединений одноуглеродный фрагмент, является этилхлорформиат.

Мы провели исследование реакции амидиногидразонов **1** с этилхлорформиатом в различных условиях, что позволило нам получить серию новых бициклических пиримидо-1,2,4-триазинов **2** и моноциклических 1,2,4-триазинов **3**.



Индивидуальность и структура полученных соединений установлена с помощью данных ЯМР  $^1\text{H}$ , ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии. На основании данных УФ-спектроскопии были изучены электронные характеристики полученных продуктов.

1. Nassar I.F. // J. Heterocyclic Chem. 2013. V. 50. P. 129–134.

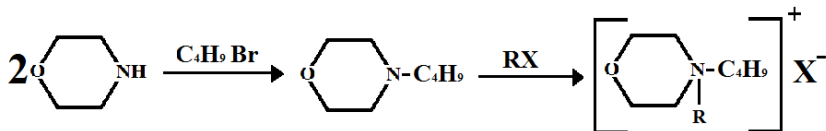
## СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ N-БУТИЛМОРФОЛИНИЯ

Орликова Ю.А.

Тверской государственный университет  
170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33

К важнейшим шестичленным неароматическим циклам с двумя гетероатомами относится морфолин (тетрагидрооксазин), который по строению и свойствам является одновременно вторичным амином и циклическим эфиром. Гидрохлориды морфолина и четвертичные соли N-алкилморфолиния представляют интерес как антистатические препараты, бактерициды, ингибиторы коррозии.

В настоящей работе получены четвертичные соли N-бутилморфолиния содержащие длинноцепочечные радикалы и принадлежащие к классу катионных поверхностно-активных веществ (ПАВ). N-бутилморфолин получен алкилированием морфолина бутилбромидом (соотношение реагентов 2:1) без растворителя при 50–60 °С в течение 6–8 часов; продукт реакции перегоняли в вакууме. Четвертичные соли N-бутилморфолиния получены кватернизацией высшими алкилгалогенидами при 60–70 °С в течение 8–10 часов.



где: R = C<sub>9</sub>H<sub>19</sub>; C<sub>10</sub>H<sub>21</sub>; C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>; C<sub>16</sub>H<sub>33</sub>.

X = Br; I.

Четвертичные соли представляют собой кристаллические вещества; состав и строение подтверждены элементарным анализом и ПМР-